

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: МАС Хемија			
Назив предмета: Рачунарска хемија и молекулско моделовање, МХ307			
Наставник/наставници: Борко Матијевић			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: Нема			
Циљ предмета: Упознавање студената са значајем рачунарске хемије и молекулског моделовања, као и неопходност њене примене у решавању многобројних проблема у хемији. Проширивање разумевања основних хемијских принципа и њихова свеобухватнија примена коришћењем софтверских пакета. Стицање неопходног теоријског знања и вештина за коришћење многобројних рачунарских програма за разноврсна израчунавања и моделовања. Напредно решавање питања и проблема који се не могу решити експерименталним путем, већ само применом рачунара. Приближавање поступка планирања експерименталног рада у различитим областима хемије, утврђивање геометрије, многобројних параметара и крајње оптимизације молекула.			
Исход предмета: Након успешно завршеног курса, студент ће бити у стању да: самостално користи разноврсне рачунарске алате и методе за молекулско моделовање и решавање проблема који се могу једино решити коришћењем информатичког приступа; критички одабере погодну рачунарску методу за прорачуне; оптимизује геометрију молекула, изврши његову визуализацију; планира ток одигравања реакције, одреди спектралне карактеристике и предвиди њихову потенцијалну примену; добијене резултате прорачуна успешно самостално протумачи и користи у појашњењу добијених експерименталних резултата или у будућем планирању експерименталног рада.			
Садржај предмета Теоријска настава Појам рачунарске хемије и молекулског моделовања. Рачунарске методе у хемији и алати у хемиинформатици. Молекулска механика. Квантна механика. Геометрија молекула, стереохемија и оптимизација. Конформациона анализа и молекулска динамика. Предвиђање понашања једињења на основу теоријских израчунавања. Планирање експерименталног рада и предвиђање тока реакције. Молекулско моделовање и дизајн у синтезама. Одређивање спектралних карактеристика и повезивање структуре молекула са њиховим потенцијалним биолошким активностима. Молекулски докинг. Практична настава Рад са различитим програмским пакетима који се користе у хемиинформатици. Молекулска механика, алгоритми оптимизације, конформациона анализа и оптимизација геометрије молекула. Визуализација молекула. Коришћење квантно-механичких метода (<i>Ab initio</i> , семиемпиријске и DFT) за решавање проблема у хемији. Предвиђање спектралних карактеристика молекула и њихове потенцијалне фармаколошке примене. Молекулски докинг. Коришћење база података.			
Литература С. Марковић, З. Марковић, <i>Молекулско моделирање</i> , Центар за научно-истраживачки рад САНУ и Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2012. М. Златановић, Д. Петровић, <i>Основи молекулског моделовања</i> , Хемијски факултет, Београд, 2016. Д. Вељковић, <i>Практикум из рачунарске хемије</i> , Хемијски факултет, Београд, 2020. Помоћна литература А. R. Leach, <i>Molecular Modeling – principles and applications</i> , 2 nd ed., Pearson Education, Edinburgh, 2001. Н.-D-Höltje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, <i>Molecular Modeling-basic principles and applications</i> , 3 rd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2008.			
Број часова активне наставе		Теоријска настава:	Практична настава:
Методе извођења наставе Предавања, рачунарске вежбе, семинарски рад			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	5	усмени испт	40
практична настава	30		
семинар-и	25		